

Title	1.固体Neのエネルギーバンド計算(新潟大学理学部物理学教室,修士論文題目・アブストラクト(1987年度)その2)
Author(s)	山上, 浩志
Citation	物性研究 (1988), 50(6): 1002-1003
Issue Date	1988-09-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/93436
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

修士論文題目・アブストラクト (1987年度) その2

○ 新潟大学理学部物理学教室

- | | |
|-----------------------------|-------|
| 1. 固体 Ne のエネルギーバンド計算 | 山上 浩志 |
| 2. 重い電子系の低温における有効相互作用の理論的研究 | 吉田 忠広 |
| 3. セレン化銅中の不純物鉄による電子スピン共鳴 | 高久 雅彦 |
| 4. 逆磁場配位プラズマの回転不安定性 | 村井 透 |
| 5. 1次元準結晶フィボナッチ系の格子振動 | 田中 幸 |

1. 固体 Ne のエネルギーバンド計算

山 上 浩 志

閉殻構造をもつ Ne 原子は、常圧下で -248.67°C 以下において固化し、face-centered cubic (F. C. C.) 構造をもつ結晶状態が存在する。この結晶は透明な絶縁体であることが知られている。我々は、このような性質を持つ固体 Ne について、電子構造の計算を試みた。計算方法としては、APW法がよく知られているが、我々は、一次微分の不連続性を改良した Modified Slater (MS) 法を用いて実行した。MS法の matrix element は、Pendry と Capart. によって pseudo potential を通じて求められたが、我々は変分法に基づいて、これを導出した。結晶ポテンシャルに対しては、muffin-tin 近似を行ったが、Ne は閉殻構造をしており、結晶構造は packing ratio の大きな F.C.C. 構造であるので、この近似は良いと思われる。結晶ポテンシャルの導出は、以下のように行った。まず、Hartree-Fock-Slater 方程式を self-consistent に解き、atomic charge density を求めた。次に、その charge density を F.C.C. 構造に並べ、 α -expansion 法を用いて、隣りの原子からの寄与を取り込み、これにより、Crystal charge density を求めた。さらに、その charge density を用いて、ポアソン方程式を解くことから結晶ポテンシャルが得られる。その際に、クーロンポテンシャルの long-range 性を考慮するために、Ewald sum が用いられた。Exchange part については、近年 local density formalism によるものが成功をおさめているが、我々は

Slater による $X\alpha$ 法を用い, α を 1 とした。このポテンシャルを用いて, エネルギーバンドを計算する際に, 計算する永年方程式の次元を下げるだけでなく, 系統的な計算を可能にすること等から, 群論によって結晶の対称性を考慮に入れた。以上の方法で得られた結果と最近 Baroni 等によってなされた Gaussian OPW 法を用いた計算等による比較を行った。定性的には, Conduction band は most free-electron like, Valence band は Core-like であり, エネルギーバンドの sequence は一致しているが, 定量的には違いがある。また, 固体 Ne で行った方法の Te 結晶への適用についても考察を試みた。

2. 重い電子系の低温における有効相互作用の理論的研究

吉 田 忠 広

平均場からのゆらぎをボゾン場として扱うのに, 従来の汎関数積分法によらず, 密度演算子のボゾン場表現を使った。これは, 汎関数法によるとボゾンのスカラー場以外にフェルミオン間相互作用が扱えていないのに対し, 摂動論を組み立てることができ, 摂動展開でフェルミオン相互作用として重要な RKKY 相互作用も合わせ取り扱えるからである。

まず, 格子コクラン-シュリーファー模型に f 電子数の束縛からの僅かなゆらぎを許すハミルトニアンから出発し平均場の解を導いた。温度が近藤温度 T_K 以下になると, 近藤効果で重い準粒子状態の混成バンドが形成され, バンド幅が T_K 程度になる。ハミルトニアンの残された項のゆらぎが, 準粒子間の相互作用として働く。これには, 局在 f と伝導 c の一体になった重い電子の密度ゆらぎによる Kondo boson と束縛場の λ boson があり, またもとの局在 f 電子に対しては RKKY 相互作用が λ boson と絡んで enhance される効果があることが判った。得られた結果は Kondo boson のゆらぎによる準粒子間相互作用は引力的, λ boson のそれは大きく斥力的な \vec{q} (波数) 依存性があり, これらは tight binding 伝導バンドに対して \vec{q} の方向依存性, 充満電子数依存性が大きく, バンドの形にもよる。合計のボゾン場の斥力は RKKY 相互作用の引力と競争して, 重い電子のゆらぎによる増大のために後者が, 一旦は近藤効果で負けても, 重い電子状態の中では勝って磁気相の形成が可能になる場合やその反対の場合があることが分った。